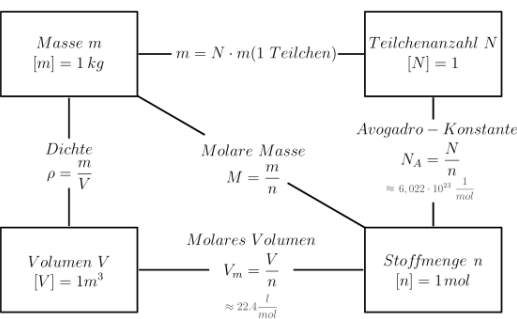


1. Basics

1.1 Unit conversions



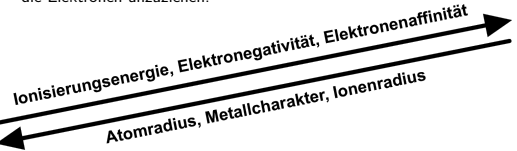
- 1. **Energy:** $1\text{eV} = 1.602 \cdot 10^{-19}\text{J}$, $1\text{cal} = 4.18\text{J}$
- 2. **Pressure:** $1\text{Pa} = 9.892\text{atm} = 1.0 \cdot 10^{-5}\text{bar} = 7.5 \cdot 10^{-3}\text{torr}$
- 3. **Amount of substance:** $1\text{mol} = 6.022 \cdot 10^{23}$ elementary entities (Avogadro constant)
- 4. **Length:** $1\text{\AA} = 10^{-10}\text{m}$
- 5. **STP thermodynamics:** $25^\circ\text{C} = 298\text{K}$, 1bar , 1mol , 1cal
- 6. **STP electrochemistry:** $25^\circ\text{C} = 298\text{K}$, 1atm , concentration 1M

1.2 Allgemeines

- **Kinetische Energie:** $E_{kin} = \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2$
- **Potentielle Energie:** $E_{pot} = m \cdot g \cdot \Delta h$
- **Elektrostatische WW:** $E_{el} = \frac{\kappa Q_1 Q_2}{d^3}$ $\kappa = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$
- **Photonenenergie:** $E_\gamma = h \cdot f = \frac{h \cdot c}{\lambda}$
- **de-Broglie-Wellenlänge:** $\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$
- **spez. wärmekapazität:** $C_s = \frac{q}{m \cdot \Delta T}$

1.3 Trends im Periodensystem

- **Ionisierungsenergie:** Energie, die nötig ist, um ein Elektron aus der neutral geladenen Atom zu entfernen.
- **Elektronenaffinität:** Frei werdende Energie, wenn ein neutrales Atom ein Elektron aufnimmt.
- **Elektronegativität:** Die Elektronegativität ist ein Maß für das Bestreben eines Atoms, innerhalb eines Moleküls von benachbarten Atomen die Elektronen anzuziehen.



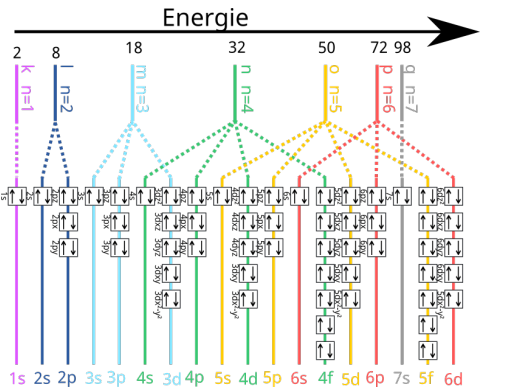
2. Atoms

2.1 Quantum mechanics

- Atomic number = #protons = #electrons
- mass number = #protons + #neutrons
- Heisenbergs uncertainty principle $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$ Due to duality of electrons (acting like waves and Teilchen at the same time), impossible to exactly describe position and momentum at same time.
- **Effektive Kernladung:** $Z_{eff} = Z - S$
- Z = Anzahl Protonen, S = Anzahl e^- auf innere Bahnen

Innerhalb einer Periode nimmt effektive Kernladung von links nach rechts zu. Daraus folgt, dass stärker an den Kern gebunden sind, der Atomradius nimmt ab.

2.2 Orbitale



- Orbitale mit dem gleichen n-Wert heissen Schalen.
- Orbitale mit dem selben n- und l-Werten heissen Unterschalen.
- Jede Schale mit Quantenzahl n hat n Unterschalen.
- Die Drehimpulszahl bestimmt die Form der Orbitale.
- Jede Unterschale hat $2l + 1$ Orbitale.

Hauptquantenzahl n: Je grösser n, desto weiter ist das elektron vom Kern entfernt. $n \in [1, 2, 3, 4]$, n bedingt l & m

Drehimpulsquantenzahl l: Bestimmt Form der Orbitale. $l \in [0, n - 1]$

Magnetische Quantenzahl m_l : Beschreibt Orientierung des Orbitals im Raum $m_l \in [-l, l]$

Spinquantenzahl m_s : Zu verstehen als Drehimpuls. Spin up \uparrow , Spin-down \downarrow

- s-Orbital \rightarrow Kugelförmig.
- p-Orbital \rightarrow Hantelförmig.
- d-Orbital \rightarrow Meistens Vierblättriges Kleeblatt.

Pauli-Prinzip: Jedes Orbital kann von maximal zwei Elektronen besetzt werden (Eins mit Spin-up, eins mit Spin-down).

Hund'sche Regel: Möglichst viele Elektronen haben den gleichen Spin, weswegen es energetisch günstiger ist, wenn alle Orbitale der äussersten Schale gefüllt werden, als wenn die Hälfte dieser Orbitale ganz gefüllt werden.

Schale	n	l	Orbitaltyp	m	s	Anzahl der Quantenzustände
K	1	0	1s	0	$\pm 1/2$	2
L	2	0	2s	0	$\pm 1/2$	2
		1	2p	-1 0 +1	$\pm 1/2$	6
M	3	0	3s	0	$\pm 1/2$	2
		1	3p	-1 0 +1	$\pm 1/2$	6
		2	3d	-2 -1 0 +1 +2	$\pm 1/2$	10
N	4	0	4s	0	$\pm 1/2$	2
		1	4p	-1 0 +1	$\pm 1/2$	6
		2	4d	-2 -1 0 +1 +2	$\pm 1/2$	10
		3	4f	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3	$\pm 1/2$	14

3. Chemische Bindungstypen

3.1 Kovalente Bindungen

Zwei Atome teilen sich ein Elektronenpaar. Bsp.:

Oktettregel: #Bindungen = 8 - #VE
 Nur für Elemente der 1. & 2. Hauptgruppe gilt Oktettregel strikt. Ab dritten HG können Elemente auch mehr Bindungen eingehen.
 !Bei H und He \rightarrow #Bindungen = 2 - #VE

3.2 Polarität & Dipolmoment

- $\Delta EN < 0.5$: Gleichmässige Verteilung der Elektronen zwischen Atomen, kein Dipolmoment.
- $\Delta EN > 0.5$: Polare Bindung, e^- näher beim elektronegativen Atom (δ^-). Ungleichmässige Verteilung der Elektronen \rightarrow Dipolmoment.

3.3 Formalladung

Wenn ein Atom mehr/weniger Bindungen macht, als nötig sind um ein VE-Oktett zu erreichen, resultiert eine Formalladung auf den Atom.
Bestimmung der Formalladung:

1. Alle Bindungen im Molekül spalten (gleichmässige Aufteilung zwischen Bindungspartnern.)
2. Formalladung je Atom = #VE - # e^- (nach Spaltung)
3. Formalladungen aufsummieren \rightarrow effektive Ladung des Moleküls.
4. **Homolytische Spaltung:** Bindung gleichmässig in der Mitte trennen

3.4 Bindungslänge & Bindungsstärke

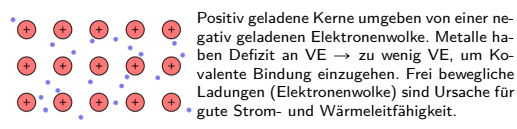
Länge: Dreifach < Doppelt < Einfach
Stärke: Dreifach > Doppelt > Einfach
Ein Molekül ist am stabilsten, wenn:

- am wenigsten Formalladungen.
- Formalladung nicht zu vermeiden sind, wenn geringste Ladungstrennung auftritt.
- negative (positive) Formalladungen auf elektronegativen (-positiven) Atomen.

3.5 Ionische Bindung

Ein Atom gibt einem anderen Atom Elektronen ab \rightarrow Kationen(+) und Anionen(-) entstehen. Bindung durch elektrostatische Anziehung. Ionische Bindung erst ab $\Delta EN > 1.7$
 Atom mit niedrigerer EN gibt Elektron ab \leftrightarrow .
 Die freiwerdende Energie, wenn sich Anion & Kation im Gitter anordnen nennt man ΔH_{Gitter}

3.6 Metallische Bindung



4. Molekülmodelle

4.1 VSEPR

Bestimmung des Modells:

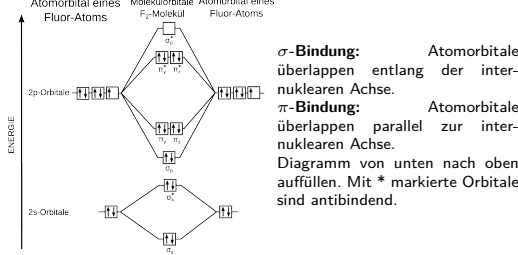
1. Zentralatom des Moleküls bestimmt.
2. Anzahl Liganden bestimmen
3. Bestimmung der freien Elektronenpaare \rightarrow Tabelle

Bindungsordnung (BO) = $0.5 \cdot (\# e^- \text{ in bindenden MO} - \# e^- \text{ in anti-bindenden MO})$
 Je höher BO, desto stabiler das System, stärker die Bindung und kürzer die Bindung.

Number of Electron Dense Areas	Electron-Pair Geometry	Molecular Geometry				
		No Lone Pairs	1 lone Pair	2 lone Pairs	3 lone Pairs	4 lone Pairs
2	Linear 180°	Linear				
3	Trigonal planar 120°	Trigonal planar	Bent			
4	Tetrahedral 109°	Tetrahedral	Trigonal pyramidal	Bent		
5	Trigonal bipyramidal 120°/90°	Trigonal bipyramidal	Sawhorse	T-shaped	Linear	
6	Octahedral 90°	Octahedral	Square pyramidal	Square planar	T-shaped	Linear

4.2 Molekül-Orbital-Modell

Bindung entsteht durch das Überlappen der Atomorbitale zweier Atome wodurch zwei neue Molekülorbitale gebildet werden.



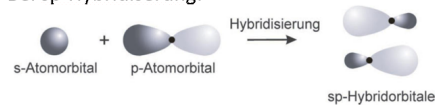
Ferromagnetische Eigenschaften von Molekülen:
Paramagnetisch: Das Molekül hat ungepaarte Elektronen und wird daher von einem Magnetfeld angezogen.
Diamagnetisch: Das Molekül hat keine ungepaarten Elektronen und wird daher von einem Magnetfeld leicht abgestossen.
 1 Pfeil in Box \rightarrow Paramagnetisch, sonst Diamagnetisch

4.3 Hybridisierung

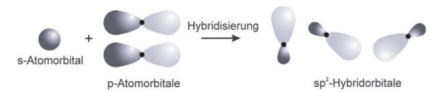
Verschmelzen von verschiedenen Orbitalen in einem Molekül.

- Bei der sp-Hybridisierung verschmelzen ein s- und ein p-Orbital miteinander. Bsp.: ethin ($\text{HC}\equiv\text{CH}$)
- Bei der sp^2 -Hybridisierung kommt zu einer Hybridisierung eines s-Orbitals und zwei p-Orbitalen. Bsp.: Ethen ($\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$)
- Bei der sp^3 -Hybridisierung verbindet sich ein kugelförmiges s- und drei hantelförmige p-Orbitale. Bsp.: Methan (CH_4)

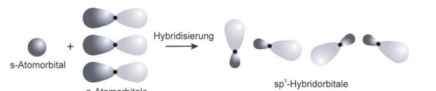
Bei sp-Hybridisierung:



Bei sp²-Hybridisierung:



Bei sp³-Hybridisierung:



5. Aggregatzustände

5.1 Intermolekulare Wechselwirkungen

- Wasserstoffbrücken** (stark)
Entstehen zwischen H und O, N, F Atomen
- Dipol-Dipol-Wechselwirkungen** (mittel)
Entstehen durch polare Bindungen ($\Delta EN > 0.5$)
- Van-der-Waals-WW/Dispersionskräfte** (schwach)
Entstehen durch temporäre Fluktuationen der Elektronen \rightarrow temporärer Dipol, **Gibts es immer**. Grosse und lange Moleküle haben die stärksten Dispersionskräfte.

5.2 Flüssigkeiten

Gefrierpunktniedrigung: $\Delta T_f = K_f m$

K_f = Kryoskopische Konst. m = Molalität $\left[\frac{mol}{kg} \right]$

Je tiefer die **Viskosität**, desto grösser die Mobilität der Moleküle. Viskosität proportional zur Stärke der WW. Je höher die Viskosität, desto dickflüssiger.

5.3 Ideale Gase

- Wir machen 2 Annahmen:
 - Gastteilchen wechselwirken nicht.
 - Gastteilchen haben kein Volumen.
- Ideales Gasgesetz: $pV = nRT = NkT$
- Dichte $\rho = M \frac{p}{V} = M \frac{p}{RT}$
- R ist die universelle Gaskonstante.
- Quadr. Mittelwert der Geschwindigkeit der Gasmoleküle:
 $u_{rms} = \sqrt{3RT/M}$
- $M \left[g \cdot mol^{-1} \right], d \left[g \cdot L^{-1} \right], V \left[L \right]$

Bei hohen Drücken verhalten sich Gase nicht mehr ideal \rightarrow korrigierte ideale Gasgleichung:

$$\left(p + \frac{n^2 a}{V^2} \right) (V - nb) = nRT$$

Partialdruck: Der Partialdruck ist der Anteil eines Gases am Druck des betrachteten Gasgemisches. Partialdrücke einer Gasmischung sind immer kleiner als der Gesamtdruck.

$$p_i = n_i \cdot \frac{RT}{V} \quad \text{Gesamtdruck} = \Sigma \text{ aller Partialdrücke}$$

5.4 Osmotischer Druck

Der Druck der benötigt würde, um Fluss von Lösungsmittelteilchen zu unterdrücken heisst osmotischer Druck.

$$\Pi = \left(\frac{n}{V} \right) RT = MRT \quad M = \text{Molarität}$$

6. Thermodynamik

6.2 0. Hauptsatz

- Sind 2 Systeme wärmeleitend verbunden, dann haben beide Systeme die gleiche Temperatur. **Thermisches Gleichgewicht**.
- Wenn drittes System mit den anderen Systemen wärmeleitend verbunden ist \rightarrow drittes System hat gleiche Temperatur.

6.2 1. Hauptsatz

- Energie kann weder aus dem Nichts erzeugt werden, noch kann sie vernichtet werden **Energieerhaltung**.
- Energie kann von einem System nur mit der Umgebung mittels Wärme oder Arbeit ausgetauscht werden.
- Der 1. Hauptsatz der Thermodynamik verbindet die innere Energie eines Systems mit der am System/vom System verrichteten Arbeit und der aufgenommenen/abgegebenen Wärme:
 $\Delta U = \Delta W + \Delta Q$
 $\Delta E < 0 \rightarrow$ exergon, $\Delta E > 0 \rightarrow$ endergon
 $Q = \text{Wärme}$ $W = \text{Arbeit}$ $U = \text{Innere Energie (manchmal E)}$

6.3 2. Hauptsatz

Entropie: Mass an Unordnung. Ist eine Zustandsfunktion

- irreversibler Prozess: $\Delta S > 0$, reversibler Prozess $\Delta S = 0$
- Die Entropie nimmt immer zu.

$$\Delta S = \frac{q_{rev}}{T} = S_{Ende} - S_{Anfang}$$

$$\Delta S = nR \cdot \ln \left(\frac{V_{Ende}}{V_{Anfang}} \right)$$

q_{rev} = Wärmemenge bei reversiblen Prozess

6.5 Gibbs Energie ΔG

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$
$$\Delta G_{rxn} = \Delta G_{Produkte} - \Delta G_{Edukte}$$
$$\Delta G_f^0 = 0 \text{ für Elemente}$$

- Spontan:** $\Delta G < 0$, **Nicht spontan:** $\Delta G > 0$

ΔH	ΔS	$-\Delta H$	ΔG	Reaktion Char.
-	+	-	-	Spontan bei allen T
+	-	+	+	Nicht spontan
-	-	+	+/-	Spontan bei low T, Nicht spontan bei high T
+	+	-	+/-	Spontan bei high T, Nicht spontan bei low T

6.4 Enthalpie ΔH

Bei konstantem Druck aufgenommenen/ abgegebenen Wärmemenge
 $\Delta H = \Delta E + p\Delta V = (q_p + w) - w = q_p$

- Endotherm: $\Delta H > 0$ (System nimmt Wärme auf)
- Exotherm: $\Delta H < 0$ (System gibt Wärme ab)

Reaktionsenthalpie:

$$\Delta H = \Delta H_{Produkte} - \Delta H_{Edukte}$$

Bildungsenthalpie:

$$\Delta H_f = \Sigma n \cdot H_f(\text{Produkte}) - \Sigma m \cdot H_f(\text{Edukte})$$

n, m = Anzahl Moleküle

Falls Edukt/Produkt nur 1 Element $\rightarrow H_f = 0$

Intensive Zustandsgrößen: Druck, absolute Temperatur

Extensive Zustandsgrößen: Volumen, Stoffmenge, Entropie

Thermodynamische Potentiale (Zustandsgrößen): innere Energie, freie Energie, Enthalpie, Gibbs-Energie

Prozessgrößen: Wärme, Arbeit

Satz von Hess: $\Delta H_{rxn} = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \dots + \Delta H_n$

7. Kinetik

7.1 Reaktionsgeschwindigkeit

$$-aV - bB - (\dots) + cC + dD + (\dots) = 0$$

$$\text{Reaktionsgesetz: } r = \frac{1}{\nu} \frac{d[X_i]}{dt} = k \prod [N_i]^{\nu_i} \quad (1)$$

ν = Stöchiometrischer Koeffizient, für Edukte + für Produkte
 $k = A \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$ A =Frequenzfak., E_a =Aktivierungsenergie, k = Geschwindigkeitskoeffizient.

Bestimmung der reaktionsgeschwindigkeit an Bildungsgeschwindigkeit

- Schauen, von welchem Molekül Geschwindigkeit gefragt, von welchem gegeben
- Koeffizienten der betroffenen Moleküle merken
- In 1 einsetzen und nach gesuchter Geschwindigkeit auflösen

7.2 Reaktionsordnung

Reaktionsordnung bezüglich eines Edukts = Betrag seines stöch. Koeffizienten. Gesamtordnung = Summe aller Ordnungen der Edukte.

Bsp., $NH_4^+ + NO_2^- \rightarrow N_2 + 2H_2O$ mit

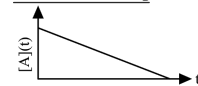
$$\text{Geschwindigkeitsgesetz: } r = k[NH_4^+]^1[NO_2^-]^1$$

$$m_{NH_4^+} = 1; \quad m_{NO_2^-} = 1; \quad m_{N_2} = 0; \quad m_{H_2O} = 0$$

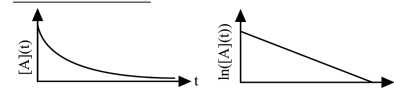
Gesamtordnung der Reaktion ist: $m_{tot} = \Sigma m_i = 2$

- 0. Ordnung:** konzentrationsunabhängig
- 1. Ordnung:** Abhängig von Konzentration 1 Reaktanten
- 2. Ordnung:** Abhängig von Konzentration 2 Reaktanten

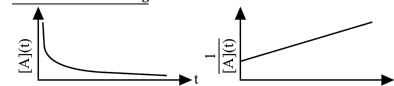
Reaktion 0. Ordnung



Reaktion 1. Ordnung



Reaktion 2. Ordnung



$$\begin{aligned} A &\rightarrow \text{Produkte} \\ r &= -\frac{d[A]}{dt} = k \\ [A]_t &= [A]_0 e^{-kt} \\ t_{1/2} &= \frac{[A]_0}{2k} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A &\rightarrow \text{Produkte} \\ r &= -\frac{d[A]}{dt} = k[A] \\ [A]_t &= [A]_0 e^{-kt} \\ t_{1/2} &= \frac{\ln(2)}{k} = \frac{0.693}{k} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A &\rightarrow \text{Produkte} \\ r &= -\frac{1}{2} \frac{d[A]}{dt} = k[A]^2 \\ \frac{1}{[A]_t} &= 2kt + \frac{1}{[A]_0} \\ t_{1/2} &= \frac{1}{[A]_0 2k} \end{aligned}$$

7.3 Molekularität einer Reaktion

Anzahl der an Elementarreaktionen teilnehmenden Molekülen.

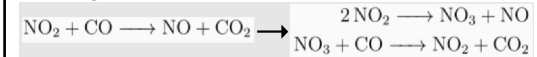
Elementarreaktion: Einzeler, irreversibel Schritt.

Unimolekular: $A \rightarrow \text{Produkten}$

Bimolekular: $A + B \rightarrow \text{Produkten}$

Trimolekular: $2A + B \rightarrow \text{Produkten}$

Mehrstufige reaktion: Reaktion aus mehreren Elementarreaktion Bsp.:



Geschwindigkeitsgebender Schritt: Einzelne Elementarreaktionen oftmals nicht gleich schnell \rightarrow Geschwindigkeit annäherbar durch Geschwindigkeit des langsamsten Schritts.

Reaktions und Geschwindigkeitsgesetz bestimmen:

- Alle Gleichungen addieren, Gleiches kürzen \rightarrow Reaktion
- Produkte langsamster reaktion \rightarrow Geschwindigkeitsgesetz

- Qualitative Temperaturabhängigkeit von k:**

Die Erhöhung der Temperatur um $10^\circ C$ hat eine Verdoppelung der reaktionsgeschwindigkeit r bzw. des Geschwindigkeitskoeffizient k zur Folge.

- Qualitative Temperaturabhängigkeit von k:**

$$k(T) = A \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad \ln(k(T)) = -\frac{E_a}{RT} + \ln(A)$$

8. Säure und Basen

Allgemein

Für die Reaktion $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$

$$K = \frac{k_{Hin}}{k_{Rück}} = \frac{[\text{Produkte}]}{[\text{Edukte}]} = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

$K \gg 1 \rightarrow$ GGW rechts $K \ll 1 \rightarrow$ GGW links

8.1 Prinzip von le Châtelier

- Konzentrationsänderung:** Erhöhung der Reaktanten führt zu Beschleunigung der Hin-Reaktion
- Druckänderung:** Wird Druck in System erhöht \rightarrow GGW verschiebt sich in Richtung Seite mit weniger teilchen.
- Temperaturänderung:** Endotherme Reaktion wird bei Erhöhung bevorzugt.

8.2 Brönsted-Definition

S-B-Reaktion sind GGW-Reaktionen.



- Säuren geben H^+ ab (Protonendonatoren).

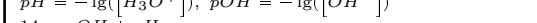
- Basen nehmen H^+ auf (Protonenakzeptoren).

- Schwache Säure: $K < 1$

- GGW bei $H A$

- Starke Säure: $K \gg 1$

- GGW bei A^-



$$pH = -\lg([H_3O^+]), \quad pOH = -\lg([OH^-])$$

$$14 = pOH + pH$$

8.3 PH-Skala $pK_S = -\log K_S$

- Saure Lsg. pH-Wert < 7
- Basische Lsg. pH-Wert > 7
- hoher $K_S \rightarrow$ starke Säure
- tiefer $K_S \rightarrow$ starke Base

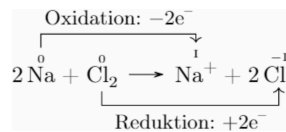
pH-Wert bestimmen: $pH = -\log(c([Säure])) = 14 - pOH$

8.4 Redoxreaktion

Allgemeines

- Reaktion bei welcher Elektronen zwischen reaktionspartnern ausgetauscht werden
- Oxidation:** Abgabe von e^- , Oxidationszahl wird erhöht (Reduktionsmittel wird oxidiert).
- Reduktion:** Annahme von e^- , Oxidationszahl wird gesenkt (Oxidationsmittel wird reduziert).

Oxidationszahl: \pm # VE eines Atoms-#Elektronen verbleibend am Atom nach heterolytischer Spaltung:



8.5 Heterolytische Spaltung

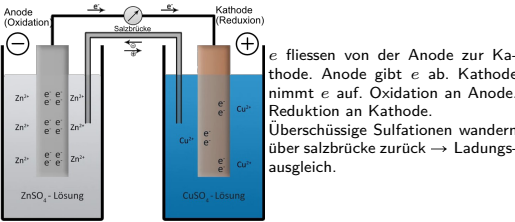
Beispiel

$\text{N}=\text{C}=\text{S}^-$
Heterolytische Bindungsspaltung:
 :N: #VE - e nach het.Sp. = 5 - 8 = -III
 C #VE - e nach het.Sp. = 4 - 0 = +IV
 :S: #VE - e nach het.Sp. = 6 - 8 = -II
Kontrolle: Die Oxidationszahlen summieren sich zu -I, was auch der effektiven Ladung des Moleküls entspricht.

1. Gesamtladung = Summe der Oxidationszahlen.
2. Homonukleare Moleküle An haben die Oxidationszahl
3. Bei einatimigen Ionen: Ladung = Oxidationszahl.
4. Wasserstoff am Metall → Hydrid (-I)
5. Wasserstoff am Nichtmetall → Proton (+I)
6. Sauerstoff oft -II
7. Fluor immer -I, da elektronegativestes Element

Oxidationsmittel: Stoff, welcher andere Stoffe oxidiert und dabei selbst reduziert wird, da er gerne Elektronen aufnimmt. **Reduktionsmittel:** Stoff, welcher andere Stoffe reduziert und dabei selbst oxidiert wird, da er gerne Elektronen abgibt.

8.6 Galvanische Zelle



Die Zellspannung E_{Zelle} gibt Unterschied zwischen den Elektrodenpotentialen wieder. Der Unterschied in diesem Potential ist die EMK. Zellspannung in Volt. $E_{Zelle} = E_{Red}(Kat.) - E_{Red}(Ano.) = E_{Red}(Red) - E_{Red}(Ox)$